

нуклеофильных групп растворителей; в электронных спектрах поглощения при прибавлении щелочи к раствору 2,4,7-тринитрофлуоренона появляются максимумы в области 19365 и 24603 см<sup>-1</sup>, характерные для комплексов Мейзенгеймера. В ИК спектрах выделенных комплексов наблюдаются новые полосы, характерные для введенных нуклеофильных реагентов.

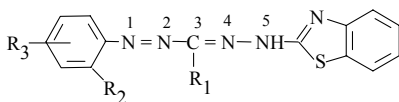
Согласно выполненному квантово-химическому расчету с помощью программного обеспечения МОРАС 6.0 полуэмпирическим методом AM1 с полной оптимизацией всех геометрических параметров, установлено, что атомы С3 и С9 флуоренового цикла является наиболее подверженными нуклеофильной атаке, а наиболее стабильным - комплекс, содержащий в качестве нуклеофила диметилформаимидный радикал, что подтверждено экспериментально.

## МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИЕ КОМПЛЕКСЫ НИКЕЛЯ КАК НОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ

*Калимуллина А.А., Резинских З.Г., Горбатенко Ю.А.,  
Первова И.Г., Липунов И.Н.*

Уральский государственный лесотехнический университет,  
Екатеринбург

Создание высокоактивных функциональных и структурных моделей каталитических систем входит в число приоритетных проблем координационной и органометаллической химии. В данной работе на основе многофункциональных полиядерных лигандов - бензтиазолилформаза-нов осуществлен направленный синтез мономерных и твердофазных комплексных соединений никеля (II).



R<sub>1</sub>: CH<sub>3</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>, CH=CH-CH<sub>3</sub>,  
CH(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>;  
R<sub>2</sub>: H, OH, COOH;  
R<sub>3</sub>: H, 4-COOH, 4-SO<sub>3</sub>H,  
5-SO<sub>3</sub>H, 5-NO<sub>2</sub>, 4-N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>.

Металлосодержащие мономеры получены в условиях избытка лиганда – при соотношении L:Ni=2:1 и недостатка лиганда - L:Ni=1:1.

Синтез твердофазных металлокомплексов проводили двумя способами: 1) сорбцией ионов никеля (II) на модифицированных сульфосодержащими формазаами анионитах (АН-18×10, АН-22×12 и АН-22×6) в статических условиях из водного раствора нитрата никеля; 2) химическим закреплением предварительно сформированных формазанатов ни-

келя (II) на исходном полимерном носителе. Найдены оптимальные условия их синтеза.

Совокупностью данных элементного анализа и спектральных методов исследования (электронной, ИК-спектроскопии) установлено, что при избытке лиганда формируются комплексы состава  $Ni|4N|$  с координацией металла по  $N_1$  и  $N_5$  формазановой цепи, в то время как недостаток лиганда способствует образованию комплексов состава  $Ni|3N,O|$ , экваториальную плоскость которого образуют один атом кислорода от ОН- или СООН-группы и три атома азота, в том числе от бензтиазольного гетероцикла.

Каталитические свойства синтезированных азот- и кислородсодержащих никельсодержащих мономеров и их твердофазных аналогов изучены в условиях низкотемпературного (0-3°C) и высокотемпературного (до 60°C) катализа в различных окислительно-восстановительных реакциях. Установлено влияние состава координационной сферы никельсодержащих комплексов на их каталитическую активность, рассмотрена возможность циклического использования твердофазных катализаторов.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 05-03-32023.*

## ОБРАЗОВАНИЕ СИЛЬНЫХ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ МОЛЕКУЛАМИ И ИОНАМИ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

*Бондарев А.А., Смирнов И.В.*

Алтайский государственный медицинский университет, Барнаул

Неэмпирические квантово-химические расчеты DFT выполнялись с помощью стандартного пакета программ GAMESS методом B3LYP/6-311G\* с обменным функционалом Беке (B3) и корреляционным функционалом Ли, Янга и Пара (LYP). Геометрии рассчитанных молекул были полностью оптимизированы, отсутствие мнимых частот колебаний подтверждало их стационарный характер. Рассчитанные параметры водородной связи в изученных системах, содержащих органические ионы и молекулы представлены в таблице.

Наиболее прочные водородные связи образуются при взаимодействии нейтральных органических молекул с молекулами, содержащими карбоксильный анион. В ряду муравьиной, уксусной и бензойной кислот прочность водородной связи изменяется незначительно.